

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой
материаловедения и индустрии наносистем
Академик РАН


В.М. Иевлев
подпись, расшифровка подписи

26.03.2020 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.07.02 Спектроскопические методы исследования материалов

1. Код и наименование направления подготовки/специальности:

04.03.02 – Химия, физика и механика материалов

2. Профиль подготовки/специализация: *Материаловедение и индустрия наносистем*

3. Квалификация выпускника: *бакалавр*

4. Форма обучения: *очная*

5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины: *материаловедения и индустрии наносистем*

6. Составители программы: *Сладкопевцев Борис Владимирович, кандидат химических наук*

7. Рекомендована: научно-методическим советом химического факультета, протокол 3 от 19.03.2020

8. Учебный год: 2022/2023

Семестр(ы): 5

9. Цели и задачи учебной дисциплины

Целями освоения учебной дисциплины являются: формирование у студентов представлений о современных спектроскопических методах исследования материалов, знакомство с теоретическими основами методов, их практическим использованием, современным оборудованием.

Задачи учебной дисциплины:

В результате изучения дисциплины студент должен:

- иметь современные представления о взаимодействии излучения с веществом, теоретические основы образования спектров;
- знать основные методы спектроскопического анализа, способы их классификации;
- понимать принципы работы оборудования, применяемого в спектроскопических исследованиях;
- научиться в общих чертах интерпретировать результаты анализов, извлекать из спектров информацию о составе, свойствах, особенностях материалов;
- уверенно овладеть терминологией, используемой в спектроскопических методах, знать применяемые сокращения, российские и международные.

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП:

Дисциплина входит в часть, формируемую участниками образовательных отношений (вариативная) блока Б1.

Требования к входным знаниям, умениям и навыкам: для освоения курса студент должен быть знаком с основными разделами физики, общей и неорганической химии. Изучение данной дисциплины базируется на дисциплине «Физика», изученной студентами ранее. Для успешного освоения дисциплины необходимы знания, полученные в разделе «Оптика»

Данная дисциплина является предшествующей дисциплинам Б1.В.09 «Нанотехнологии», Б1.В.10 «Наноматериалы», Б1.В.14 «Нанокластеры и наноструктуры: синтез и свойства», Б1.В.11 «Тонкие пленки и гетероструктуры», в рамках которых студенты применяют знания, полученные при изучении дисциплины «Спектроскопические методы исследования материалов». Параллельно студентами изучается дисциплина Б1.О.12 «Современная аналитическая химия».

11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями) и индикаторами их достижения:

Код	Название компетенции	Код(ы)	Индикатор(ы)	Планируемые результаты обучения
ПКВ-3	Способен проводить обработку и анализ результатов исследования, полученных основными методами анализа веществ, элементного и фазового состава, структуры и свойств материалов (включая наноматериалы)	ПКВ-3.1	Обладает знаниями возможностей основных методов анализа веществ, элементного и фазового состава, структуры и свойств материалов (в том числе наноматериалов)	знать: основные группы современных спектроскопических методов исследования материалов и их возможности для анализа состава и структуры материалов (в том числе наноматериалов); уметь: выбирать спектроскопические методы исследования для решения конкретной материаловедческой задачи; владеть: навыками оценки возможности использования конкретного спектроскопического метода исследования для решения поставленной задачи
		ПКВ-3.2	Способен обрабатывать и анализировать результаты типовых методов исследования	знать: особенности интерпретации результатов спектроскопических методов анализа состава материалов уметь: обрабатывать результаты типовых спектроскопических методов исследования состава материалов

			состава, структуры и свойств материалов (в том числе наноматериалов)	владеть: навыками интерпретации результатов спектроскопического исследования
ПКВ-4	Способен проводить анализ сырья и компонентов, аттестацию производимых материалов по структуре и свойствам	ПКВ-4.1	Выполняет стандартные технологические операции для характеристики сырья, промежуточной и конечной продукции производства материалов	знать: основные операции, выполняемые при характеристике сырья, промежуточной и конечной продукции производства материалов спектроскопическими методами исследования уметь: выбирать необходимые методы для характеристики сырья, промежуточной и конечной продукции производства материалов владеть: базовыми навыками подготовки образцов и работы со спектроскопическим оборудованием
		ПКВ-4.2	Составляет протоколы аттестации материалов и отчёты о выполненной работе в соответствии с заданной формой	знать: предъявляемые требования к протоколам аттестации материалов спектроскопическими методами; уметь: составлять протоколы аттестации и отчёты о проведённых исследованиях состава сырья и компонентов владеть: навыками составления протоколов аттестации материалов и отчетов о выполненной работе

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час. — 4/144.

Форма промежуточной аттестации – зачет

13. Трудоемкость по видам учебной работы

Вид учебной работы		Трудоемкость		
		Всего	По семестрам	
			5 семестр	6 семестр
Контактная работа		72	72	
в том числе:	лекции	36	36	
	практические	36	36	
	лабораторные	–	–	
	курсовая работа	–	–	
Самостоятельная работа		72	72	
Промежуточная аттестация (для экзамена)				
Итого:		144	144	

13.1. Содержание дисциплины

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Реализация раздела дисциплины с помощью онлайн-курса, ЭУМК *
1. Лекции			
1.1	Основные понятия предмета. Классификация спектроскопических методов	История развития спектроскопических исследований. Создание классического спектрального анализа. Открытие гелия на Солнце. Открытие новых химических элементов.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10441

		<p>Современные области применения спектральных методов.</p> <p>Классификация спектроскопических методов – по типу зондирующего излучения, по характеру взаимодействия излучения с веществом, по длинам волн спектра, по объекту исследования.</p>	
1.2	<p>Теоретические основы образования спектров.</p> <p>Взаимодействие излучения с веществом.</p>	<p>Взаимодействие излучения с веществом. Спектры поглощения, испускания и рассеяния.</p> <p>Энергетические уровни в атомах, переходы между ними.</p> <p>Серии спектральных линий в атоме водорода, формула Ридберга. Спектры многоэлектронных атомов, расщепление линий. Понятие ширины спектральной линии, причины уширения линий.</p>	
1.3	<p>Методы определения элементного состава веществ</p>	<p>Обзор методов элементного анализа.</p> <p>Рентгеновские методы. Характеристическое рентгеновское излучение.</p> <p><u>Рентгенофлуоресцентный анализ.</u> Используемое оборудование. Излучатели, рентгеновские трубки.</p> <p>Детекторы. Характерный вид спектров.</p> <p>Применение метода, достоинства и недостатки.</p> <p><u>Локальный рентгеноспектральный микроанализ.</u></p> <p>Принцип метода, используемое оборудование.</p> <p>Требования к образцам. Возможности метода.</p> <p><u>Электронные методы.</u> Фотоэлектронная спектроскопия – теоретические основы метода. Фотоэффект. Внутренний и внешний фотоэффект. Используемые источники излучения. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия основных уровней и ультрафиолетовая спектроскопия валентных уровней. Области применения.</p> <p><u>Ионные методы.</u> Рассеяние медленных и быстрых ионов. <u>Обратное резерфордовское рассеяние.</u> Излучатели, детекторы. Принципы и аналитические возможности методов.</p> <p><u>Оптические методы.</u> Атомный абсорбционный и атомный эмиссионный анализ. Конструкции приборов. Стилоскопы, стилометры, спектрографы, спектрометры. Способы ионизации вещества. Подготовка и внесение проб. Диспергирующие системы – призмы, дифракционные решетки. Области применения, достоинства и недостатки методов.</p> <p>Сравнение различных методов элементного анализа, их достоинств и недостатков.</p>	
1.4	<p>Методы определения химического состава веществ</p>	<p>Общий обзор методов. Определение состава вещества по химическим сдвигам фотоэлектронных спектров. Масс-спектрометрия, хромато-масс-спектрометрия. Возможности масс-спектрометрии по определению молекулярной формулы вещества на основе образования молекулярных ионов.</p> <p><u>Молекулярный абсорбционный анализ.</u></p> <p>Теоретические основы образования молекулярных спектров.</p> <p>УФ-спектроскопия. Области применения.</p> <p>Исследование органических и неорганических соединений.</p> <p><u>Полуколичественный и количественный химический анализ.</u></p> <p>Определение интенсивности, закон Бугера-Ламберта-Бера, эталоны. Виды количественных методов. Источники ошибок. Используемое оборудование – спектрофотометры, фильтры и т.п.</p>	

		Колебательная ИК-спектроскопия. Колебательная структура полос, интерпретация спектров. Спектроскопия комбинационного рассеяния. Спектроскопия ЯМР. Теоретические основы метода. Используемое оборудование. Применение спектроскопии ЯМР для качественного анализа.	
1.5	Методы определения пространственного строения молекул	Вращательная спектроскопия (инфракрасная и микроволновая). Вращательная структура полос. Определение вращательной энергии молекул и расчет на их основе геометрических параметров – валентных углов, длины и кратности связи. Интерпретация спектров. Области применения метода. Определение электрического дипольного момента молекул. Спектроскопия ЭПР. Теоретические основы метода. Оборудование. Возможности его применения.	
2. Практические занятия			
2.1	Основные понятия предмета. Классификация спектроскопических методов	Свойства излучения. Дифракция. Интерференция. Излучение абсолютно черного тела. Решение задач.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10441
2.2	Теоретические основы образования спектров. Взаимодействие излучения с веществом.	Серии спектральных линий в атоме водорода, формула Ридберга. Решение задач.	
2.3	Методы определения элементного состава веществ	Рентгеновские методы. Характеристическое рентгеновское излучение. Решение задач. Оже-спектроскопия. Теоретические основы метода. Эффект Оже. Используемое оборудование. Подходы к анализу и интерпретации спектров. Анализ профилей распределения элементов по толщине плёнки. Реферат. Обсуждение	
2.4	Методы определения химического состава веществ	УФ-спектроскопия. Области применения. Исследование органических и неорганических соединений. Рефераты. Обсуждение	
2.5	Методы определения пространственного строения молекул	Газовая электронография. Принцип метода. Определение геометрии молекул. Спектроскопия ЭПР. Теоретические основы метода. Оборудование. Возможности его применения. Рефераты. Обсуждение	
3. Лабораторные занятия			
3.1			
3.2			

13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (количество часов)				
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	Всего
1	Основные понятия предмета. Классификация спектроскопических методов	2	4	–	6	12
2	Теоретические основы образования спектров. Взаимодействие излучения с веществом.	4	5	–	14	23
3	Методы определения элементного состава веществ	12	10	–	20	42
4	Методы определения	14	11	–	20	45

	химического состава веществ					
5	Методы определения пространственного строения молекул	4	6	–	12	22
	Итого:	36	36	–	72	144

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

В процессе изучения дисциплины предполагаются: работа с конспектами лекций и литературными источниками; решение задач и выполнение практических заданий; проведение контрольных работ; подготовка и защита рефератов.

На лекциях студенты знакомятся с теоретическим материалом. На практических занятиях проводится решение задач, обсуждение теоретического материала в формате семинарских занятий, выступление с докладами, проведение контрольных работ. В рамках организации самостоятельной работы студенты работают с конспектами лекций, получают и усваивают теоретические знания с использованием списка основной и дополнительной учебной литературы, учебно-методических пособий, решают задачи, готовят рефераты.

Текущий контроль проводится в форме устного опроса, контрольных работ.

Возможно получение зачёта автоматом при выполнении требований, перечисленных в п. 20.

Организация изучения дисциплины предполагает использование дистанционных образовательных технологий с применением инструментов электронной информационно-образовательной среды ВГУ «Электронный университет ВГУ». ЭУМК «Спектроскопические методы исследования материалов» на портале ВГУ «Электронный университет» содержит методические материалы, презентации лекций, ссылки на обучающие видеозаписи, учебные пособия и необходимые для изучения дисциплины материалы. При реализации дисциплины также используются сервисы видеоконференций (BigBlueButton, Zoom, Discord и др.), электронная почта, мессенджеры и социальные сети.

15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины (список литературы оформляется в соответствии с требованиями ГОСТ и используется общая сквозная нумерация для всех видов источников)

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1.	Основы аналитической химии : в 2 т. : учебник : для студ. вузов, обуч. по хим. направлениям / под ред. Ю. А. Золотова. – Москва : Академия, 2012.
2.	Беккер Ю. Спектроскопия : монография / Ю. Бёккер ; пер. Л. Н. Казанцева. – Москва : РИЦ Техносфера, 2009. – 528 с. // «Университетская библиотека ONLINE» : электронно-библиотечная система. – URL: http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=88994

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
3.	Пентин Ю. А. Физические методы исследования в химии / Ю. А. Пентин, Л. В. Вилков. – Москва : Мир : АСТ, 2003. – 683 с.
4.	Пупышев А. А. Атомно-абсорбционный спектральный анализ / А. А. Пупышев. – Москва : Техносфера, 2009. – 784 с.
5.	Альффорд Т. Л. Фундаментальные основы анализа нанопленок / Т. Л. Альфорд, Л. К. Фелдман, Д. В. Майер ; Пер. с англ. Образцов А. Н., Долганов М. А., науч. ред. Образцов А. Н. – Москва : Научный мир, 2012. – 392 с.
6.	Васильев В. П. Аналитическая химия в 2 кн. Физико-химические методы анализа / В.П. Васильев. – Москва : Дрофа, 2007. – 382 с.
7.	Кукуев В. И. Физические методы исследования тонких пленок и поверхностных слоев / В. И. Кукуев, И. Я. Миттова, Э. П. Домашевская. – Воронеж : Изд-во Воронежского государственного университета, 2001. – 144 с.
8.	Борн М. Атомная физика / М. Борн. – Москва : Мир, 1970. – 484 с.

9.	Фелдман Л. Основы анализа поверхности и тонких пленок / Л. Фелдман, Д. Майер ; пер. с англ. В. А. Аркадьева и Л. И. Огнева; под ред. В. В. Белошицкого. – Москва : Мир, 1989. – 342 с.
10.	Вудраф Д. Современные методы исследования поверхности / Д. Вудраф, Т. Делчр ; пер. с англ. под ред. В. И. Раховского. – Москва : Мир, 1989. – 568 с.
11.	Карлсон Т. Фотоэлектронная и Оже-спектроскопия / Т. А. Карлсон. – Ленинград : Машиностроение, 1981. – 431 с.
12.	Барсуков В. И. Атомный спектральный анализ / В. И. Барсуков. – Москва : Издательство Машиностроение-1, 2005. – 132 с.
13.	Ельяшевич М. А. Атомная и молекулярная спектроскопия: Общие вопросы спектроскопии / М. А. Ельяшевич. – Москва : Комкнига, 2006. – 240 с.
14.	Плиев Т. Н. Молекулярная спектроскопия : В 5 т. / Т. Н. Плиев. – Владикавказ : Иристон, 2001.
15.	Количественные методы в масс-спектроскопии. Лаваньини И., Маньо Ф., Сералья Р., Тральди П. – Москва : Техносфера, 2008. – 176 с.
16.	Вульфсон Н.С. Масс-спектрометрия органических соединений / Н.С. Вульфсон, В.Г. Заикин, А.И. Микая. – Москва : Химия, 1986. – 312 с.
17.	Мазалов Л.Н. Рентгеноэлектронная спектроскопия и ее применение в химии / Л.Н. Мазалов // Соросовский образовательный журнал, 2000. – № 4. – С. 37-44.

в) информационные электронно-образовательные ресурсы (официальные ресурсы интернет)*:

№ п/п	Ресурс
18.	https://www.lib.vsu.ru/ - сайт Зональной Научной Библиотеки Воронежского государственного университета
19.	http://elibrary.ru/defaultx.asp – Научная электронная библиотека. Поиск по рефератам и полным текстам статей, опубликованных в российских и зарубежных научно-технических журналах.

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы (учебно-методические рекомендации, пособия, задачки, методические указания по выполнению практических (контрольных), курсовых работ и др.)

№ п/п	Источник
1.	Чертов А. Г. Задачник по физике / А. Г. Чертов, А. А. Воробьев. – Москва : Изд-во Физматлит, 2008. – 640 с.
2.	Оптика и атомная физика. Практическое пособие к контрольным работам / З. А. Либерман [и др.] – Воронеж : ВГУ, 2005. – Ч. 3. – 31 с.
3.	Коренман Я. И. Задачник по аналитической химии. Физико-химические методы анализа / Я. И. Коренман, П. Т. Суханов. – Воронеж : Изд-во ВГТА, 2004. – 359 с.
4.	Задачник по физико-химическим методам анализа / Ю. С. Ляликов [и др.]. – Москва : Химия, 1972. – 271 с.

17. Образовательные технологии, используемые при реализации учебной дисциплины, включая дистанционные образовательные технологии (ДОТ), электронное обучение (ЭО), смешанное обучение):

При реализации дисциплины используются различные типы лекций – вводные лекции, информационные лекции с визуализацией (мультимедийные презентации), по отдельным темам – обзорные. На практических занятиях: выступление с рефератами, семинарские занятия, решение задач. Текущая аттестация осуществляется в форме устного опроса и контрольных работ, промежуточная – по КИМ.

При реализации дисциплины с использованием дистанционных образовательных технологий используются инструменты электронной информационно-образовательной среды ВГУ «Электронный университет ВГУ» (<https://edu.vsu.ru>), сервисы видеоконференций (BigBlueButton, Zoom, Discord и др.), электронная почта, мессенджеры и социальные сети.

18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

19. Оценочные средства для проведения текущей и промежуточной аттестаций

Порядок оценки освоения обучающимися учебного материала определяется содержанием следующих разделов дисциплины:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция(и)	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
1.	Основные понятия предмета. Классификация спектроскопических методов	ПКВ-3	ПКВ-3.1 ПКВ-3.2	Устный опрос
2.	Теоретические основы образования спектров. Взаимодействие излучения с веществом.	ПКВ-3	ПКВ-3.1 ПКВ-3.2	Устный опрос Контрольная работа №1
3.	Методы определения элементного состава веществ	ПКВ-3 ПКВ-4	ПКВ-3.1 ПКВ-3.2 ПКВ-4.1 ПКВ-4.2	Устный опрос Контрольная работа №2 Защита рефератов
4.	Методы определения химического состава веществ	ПКВ-3 ПКВ-4	ПКВ-3.1 ПКВ-3.2 ПКВ-4.1 ПКВ-4.2	Устный опрос Контрольная работа №3 Защита рефератов
5.	Методы определения пространственного строения молекул	ПКВ-3 ПКВ-4	ПКВ-3.1 ПКВ-3.2 ПКВ-4.1 ПКВ-4.2	Устный опрос Защита рефератов
Промежуточная аттестация форма контроля – зачёт				Перечень вопросов

20 Типовые оценочные средства и методические материалы, определяющие процедуры оценивания

20.1 Текущий контроль успеваемости

Контроль успеваемости по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

Контрольная работа

Реферат

Семинарское занятие

Предполагается использование балльно-рейтинговой системы (БРС).

Максимальные баллы:

- Контрольная работа – 5 баллов;
- Выступление на семинарском занятии, решение задач – 3 балла;
- Подготовка реферата – 10 баллов.

Перечень заданий для контрольных работ

Контрольная работа №1. Темы «Основные понятия предмета. Классификация спектроскопических методов» и «Теоретические основы образования спектров. Взаимодействие излучения с веществом»

Время выполнения – 60 мин. Один КИМ содержит два вопроса из перечня ниже и одну задачу. Необходимо представить развернутый ответ на вопросы, нарисовать необходимые схемы и т.д.

Теоретические вопросы

1. Способы классификации спектроскопических методов анализа.
2. Излучение. Источники излучения. Электронные пушки и рентгеновские трубки.
3. Электронное, нейтронное и ионное излучение.
4. Основные понятия – спектр; излучение; спектроскопические и дифракционные методы.
5. Серии спектральных линий в атоме водорода, формула Ридберга.
6. Электромагнитный спектр.
7. Рентгеновская флуоресценция. Рентгеновское характеристическое излучение.
8. Фотоэффект. Внутренний и внешний фотоэффект.

Задачи:

1. Решите задачу: Экспериментально установлено, что вторая спектральная линия водородной серии Брэкетта (переход на уровень 4) соответствует длине волны 2,63 мкм. Установите приближённое значение R на основании этих данных.
2. Решите задачу: На цинковую пластину падает монохроматический свет с длиной волны $\lambda = 220$ нм. Определите максимальную скорость фотоэлектронов.
3. Решите задачу: Определите длину волны де Бройля λ , характеризующую волновые свойства электрона, если его скорость составляет 10^6 м/с. Сделайте такой же подсчёт для протона.
4. Решите задачу: Какая длина волны в серии Бальмера соответствует переходу с уровня с $n = 4$ на уровень с $n = 2$?

Справочный материал для решения задач

Масса протона $m_p = 1,67 \cdot 10^{-27}$ кг	Постоянная Планка (приведённая) $\hbar = h/2\pi = 1,055 \cdot 10^{-34}$ Дж·с
Масса электрона $m_e = 9,11 \cdot 10^{-31}$ кг	Скорость света в вакууме $c = 299\,792\,458$ м·с ⁻¹
Постоянная Планка $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ Дж·с	Постоянная Ридберга $R = 1,097 \cdot 10^7$ м ⁻¹

Контрольная работа №2. Тема «Методы определения элементного состава веществ»

Время выполнения – 1 час 20 мин. Один КИМ содержит три вопроса из перечня ниже.

Теоретические вопросы и задания:

1. Спектроскопия обратного резерфордского рассеяния. Принцип, лежащий в основе метода, принципиальная схема установки. Применение метода.
2. Методы возбуждения в РФЛА. Рентгеновская трубка – схема, принцип действия. Материалы анода. Тормозное и характеристическое рентгеновское излучение.
3. Электронная Оже-спектроскопия. Принцип метода. Схема установки. Возможности метода.
4. Метод фотоэлектронной спектроскопии. Принцип, лежащий в основе метода. Внешний и внутренний фотоэффект. Основное уравнение фотоэффекта. Методы РФЭС и УФЭС.
5. Сформулируйте требования, предъявляемые к образцам в методе ЭОС. Качественный и количественный анализ. Каковы принципы получения и построения профилей распределения элементов по толщине анализируемого образца?
6. Сформулируйте требования к образцам в методе рентгеновского флуоресцентного анализа. Каковы основные этапы пробоподготовки? Количественный анализ (методы внешнего и внутреннего стандарта, метод разбавления).
7. Перечислите возможные методы атомизации пробы в методе атомного абсорбционного анализа. Каковы преимущества и недостатки каждого из них?

8. Сформулируйте требования, предъявляемые образцам, исследуемым методом РФЭС. Какую информацию можно получить, анализируя полученные данным методом спектры?

Контрольная работа №3. Тема «Методы определения химического состава веществ»

Время выполнения – 50 мин. Один КИМ содержит один из вопросов из перечня ниже. Необходимо представить развёрнутый ответ на вопрос, нарисовать необходимые схемы и т.д.

Теоретические вопросы и задания:

1. Инфракрасная колебательная спектроскопия. Сущность метода. Типы колебаний. Нормальные колебания молекул CO_2 и H_2O .
2. Инфракрасная колебательная спектроскопия. Принципиальная схема ИК спектрометра. Используемые источники излучения, диспергирующие системы и детекторы.
3. Эффект Рамана. Сущность метода спектроскопии комбинационного рассеяния. Принципиальная схема спектрометра.
4. УФ-спектроскопия. Сущность метода. Принципиальная схема спектрометра. Требования к образцам.

Описание технологии проведения

Контрольная работа проводится в письменном виде, длительность контрольной работы указана в соответствующем разделе, перечень тем для подготовки студентам известен заранее.

Требования к выполнению заданий (или шкалы и критерии оценивания)

Максимальный балл – 5.

Балл «5» ставится при выполнении всех заданий КИМ, представлении развёрнутого и правильного ответа, сопровождаемого необходимыми иллюстрациями и схемами, ответами на каждый раздел вопроса, решения задач.

Балл «4» ставится при выполнении от 60 до 80% работы, имеются отдельные неточности, не грубые ошибки.

Балл «3» ставится при выполнении от 40 до 59% работы, имеются отдельные неточности, не грубые ошибки.

Балл «2» и ниже не учитывается в балльно-рейтинговой системе.

Темы рефератов

1. Оже-спектроскопия;
2. УФ-спектроскопия. Области применения. Исследование органических и неорганических соединений;
3. ИК-спектроскопия отражения. ИК-микроскопия;
4. Спектроскопия комбинационного рассеяния. Эффект Рамана;
5. Спектроскопические методы исследования тонких плёнок;
6. Спектроскопические методы определения геометрии молекул;
7. Спектроскопия электронного парамагнитного резонанса;
8. Мёссбауэровская спектроскопия.

Требования к оформлению реферата

Реферат представляется в электронном виде в формате документа pdf, загруженного в соответствующий раздел курса «Спектроскопические методы исследования материалов» на портале «Электронный университет ВГУ».

После титульного листа должно идти содержание. Структура реферата: введение, основной текст с подразделами, заключение, список литературы. Список цитируемых источников оформляется в соответствии с ГОСТ, количество источников – не менее 15. Объём реферата – не менее 20 страниц.

В реферате необходимо отразить:

- физический принцип (или принципы), лежащий в основе данного метода;
- история развития метода, современное состояние, перспективы развития и улучшения;
- принципиальные схемы оборудования;
- требования к анализируемым образцам;

- применяемые анализаторы и детекторы;
- чувствительность метода, ограничения применимости метода;
- области применения.

Описание технологии проведения

Представление реферата проводится в формате выступления для аудитории с использованием презентации (также загружается в соответствующий раздел курса «Спектроскопические методы исследования материалов» на портале «Электронный университет ВГУ»), которая должна включать в большей мере иллюстративный материал и минимум текста (пояснения, заголовки, ключевые моменты). По итогам проводится обсуждение реферата, докладчику задаются вопросы преподавателем и студентами из аудитории.

Требования к выполнению заданий (или шкалы и критерии оценивания)

Оценивание проводится по следующим критериям:

- 1) Полнота представления материала в реферате, соответствие объёму, структуре, наличие основных разделов – максимально 3 балла;
- 2) Оформление текста реферата, презентации, соответствие требованиям и ГОСТ – максимально – 2 балла
- 3) Качество выступления и представления реферата – максимально 3 балла;
- 4) Ответы на вопросы – максимально 2 балла.

20.2 Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

Собеседование по билетам к зачету

1. Классификации спектроскопических методов анализа.
2. Спектр, виды спектров.
3. Электромагнитный спектр, основные диапазоны.
4. Излучение и его основные свойства.
5. Взаимодействие излучения с веществом. Спектры поглощения, испускания и рассеяния.
6. Свойства излучения – дифракция и интерференция. Особенности излучения черного тела.
7. Источники излучения. Электронные пушки и рентгеновские трубки.
8. Основные узлы спектроскопических приборов.
9. Стилоскопы, стилометры, спектрографы, спектрометры.
10. Закон Бугера-Ламберта-Бера и его применимость.
11. Фотоэффект и его разновидности.
12. Методы определения элементного состава веществ.
13. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, основы метода и его возможности.
14. Рентгеновская флуоресценция. Рентгеновское характеристическое излучение.
15. Ионные методы. Рассеяние медленных и быстрых ионов.
16. Резерфордское обратное рассеяние. Принципы и аналитические возможности метода.
17. Атомный эмиссионный анализ. Теоретические основы метода и его возможности.
18. Атомный абсорбционный анализ. Теоретические основы метода и возможности.
19. Пламенная фотометрия, сущность метода и его возможности.
20. УФ-спектроскопия. Области применения.
21. Люминесцентный анализ. Возможности метода. Достоинства и недостатки, основное применение.
22. Инфракрасная колебательная спектроскопия – сущность метода, аппаратное оформление и возможности.
23. Микроволновая вращательная спектроскопия.
24. Спектроскопия ЯМР. Теоретические основы метода. Оборудование.
25. Спектроскопия ЭПР. Теоретические основы метода. Оборудование. Возможности его применения.
26. Газовая электронография. Принцип метода. Определение геометрии молекул.

Каждый КИМ содержит 2 вопроса из разных разделов программы и 1 задачу.

Описание технологии проведения

На подготовку письменного ответа на вопросы КИМ (на листах ответов) даётся 60 минут, после этого проводится устная беседа.

Требования к выполнению заданий, шкалы и критерии оценивания

Для оценивания результатов обучения на зачете используются следующие показатели:

- владение понятийным аппаратом спектроскопических методов исследования материалов (теоретическими основами дисциплины);
- знание основных группы современных спектроскопических методов исследования материалов и их возможностей для анализа состава и структуры материалов (в том числе наноматериалов)
- умение применять теоретические знания для выбора спектроскопического метода исследования с целью решения конкретной задачи;
- знание особенностей интерпретации результатов спектроскопических методов анализа состава материалов;
- способность иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований.

Для оценивания результатов обучения на зачете используется «зачтено», «не зачтено». Соотношение показателей, критериев и шкалы оценивания результатов обучения.

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности компетенций	Шкала оценок
<i>Обучающийся владеет понятийным аппаратом, теоретическими основами дисциплины, понимает сущность основных спектроскопических методов и их возможности, владеет умением выбирать конкретные спектроскопические методы исследования материалов для решения поставленной задачи; способен иллюстрировать ответ примерами, фактами; может допускать отдельные незначительные ошибки при ответе.</i>	<i>Базовый уровень</i>	<i>Зачтено</i>
<i>Обучающийся демонстрирует отрывочные, фрагментарные знания, допускает грубые ошибки.</i>	–	<i>Не зачтено</i>

20.3 Фонд оценочных средств сформированности компетенций студентов, рекомендуемый для проведения диагностических работ

ПК-3 Способен проводить обработку и анализ результатов исследования, полученных основными методами анализа веществ, элементного и фазового состава, структуры и свойств материалов (включая наноматериалы)

ПК-3.1 Обладает знаниями возможностей основных методов анализа веществ, элементного и фазового состава, структуры и свойств материалов (в том числе наноматериалов)

знать: основные группы современных спектроскопических методов исследования материалов и их возможности для анализа состава и структуры материалов (в том числе наноматериалов);

уметь: выбирать спектроскопические методы исследования для решения конкретной материаловедческой задачи;

владеть: навыками оценки возможности использования конкретного спектроскопического метода исследования для решения поставленной задачи

ПК-3.2 Обрабатывает и анализирует результаты типовых методов исследования состава, структуры и свойств материалов (в том числе наноматериалов)

знать: особенности интерпретации результатов спектроскопических методов анализа состава материалов

уметь: обрабатывать результаты типовых спектроскопических методов исследования состава материалов

владеть: навыками интерпретации результатов спектроскопического исследования

ПК-4 Способен проводить анализ сырья и компонентов, аттестацию производимых материалов по структуре и свойствам

ПК-4.1 Выполняет стандартные технологические операции для характеристики сырья, промежуточной и конечной продукции производства материалов

знать: основные операции, выполняемые при характеристике сырья, промежуточной и конечной продукции производства материалов спектроскопическими методами исследования

уметь: выбирать необходимые методы для характеристики сырья, промежуточной и конечной продукции производства материалов

владеть: базовыми навыками подготовки образцов и работы со спектроскопическим оборудованием

ПК-4.2 Составляет протоколы аттестации материалов и отчёты о выполненной работе в соответствии с заданной формой

знать: предъявляемые требования к протоколам аттестации материалов спектроскопическими методами

уметь: составлять протоколы аттестации и отчёты о проведённых исследованиях состава сырья и компонентов

владеть: навыками составления протоколов аттестации материалов и отчетов о выполненной работе

Перечень заданий для оценки сформированности компетенции ПК-3:

1) закрытые задания (тестовые, средний уровень сложности):

1. Метод рентгеновского флуоресцентного анализа относится к методам определения:

а) Элементного состава

б) Химического состава

в) Структуры

г) Строения молекул

2) Люминесцентный анализ относится к группе методов:

а) Эмиссионные

б) Абсорбционные

в) Методы рассеяния

г) Рефракционные

3) Какой из перечисленных ниже методов позволяет без использования особых технических средств идентифицировать два расположенных рядом в Периодической системе химических элемента?

а) спектроскопия обратного Резерфордского рассеяния

б) рентгенофлуоресцентный анализ

в) рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия

г) масс-спектрометрия

4) Информацию о химическом (фазовом) составе образца позволяет получить один из следующих методов:

а) рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия

б) рентгенофлуоресцентный анализ

в) колебательная инфракрасная спектроскопия

г) Оже-электронная спектроскопия

5) Какие источники возбуждения могут быть использованы в методе рентгеновской флуоресценции?

а) инфракрасное излучение

б) электронный пучок

в) микроволновое излучение

г) рентгеновское излучение

6) Длинноволновая часть ИК-спектра, важная для идентификации органических соединений, называется:

- а) «**областью отпечатков пальцев**»;
- б) «регионом вещественных доказательств»;
- в) «районом наибольшего благоприятствования энергетическому поглощению»

7) Спектроскопия ЭПР может быть использована:

- а) **для структурных и кинетических исследований**
- б) для определения кристаллографических характеристик системы
- в) для выявления в исследуемом образце полярных группировок
- г) для перевода частиц в реакционноспособное состояние.

8) Колебательные спектры позволяют быстро и надежно:

- а) определить наличие в молекуле исследуемого вещества парамагнитного центра
- б) установить присутствие в исследуемом веществе тяжелого атома
- в) **установить присутствие водородсодержащих функциональных групп, кратных связей, ароматических и гетероароматических структур**
- г) определить структуру молекулы.

9) Спектры ядерного магнитного резонанса позволяют:

- а) определить в исследуемом веществе положение полярных группировок
- б) обнаружить и охарактеризовать положение в молекуле атомов O^{16} , C^{12} , Cu^{64}
- в) **обнаружить и охарактеризовать положение в молекуле водорода, углерода C^{13} , фтора, фосфора и других магнитных ядер**
- г) получить картину распределения спиновой плотности неспаренных электронов.

10) Валентные колебания в ИК спектрах – это колебания, заключающиеся:

- а) **в изменении (положительном или отрицательном) длины связи между атомами и не сопровождающееся отклонениями от межъядерной оси**
- б) в изменении валентного угла между связями при сохранении их длины
- в) в изменении пространственного положения молекулы как целого.

11) Какие спектральные линии называют резонансными?

- а) линии, для которых наиболее выражено самопоглощение
- б) **линии, отвечающие переходу электронов с возбужденных уровней на основной**
- в) линии, поддающиеся визуальному наблюдению
- г) синглетные линии
- д) дублетные и триплетные линии

12) Квант какого из перечисленных ниже типов электромагнитных излучений имеет наименьшую энергию

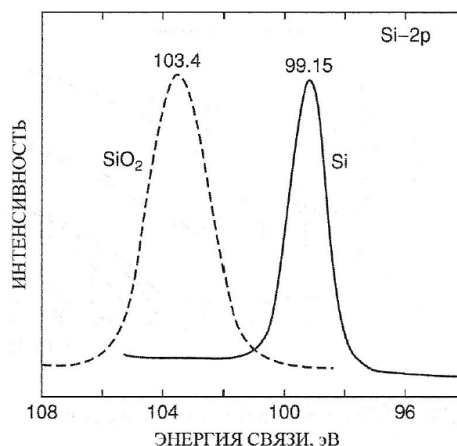
- а) видимого
- б) рентгеновского
- в) ультрафиолетового
- г) **инфракрасного**

13) Эмиссионный спектр атомов какого элемента содержит большее число линий:

- а) цезия
- б) бериллия
- в) алюминия
- г) **кобальта**

2) открытые задания (расчётные задачи, повышенный уровень сложности):

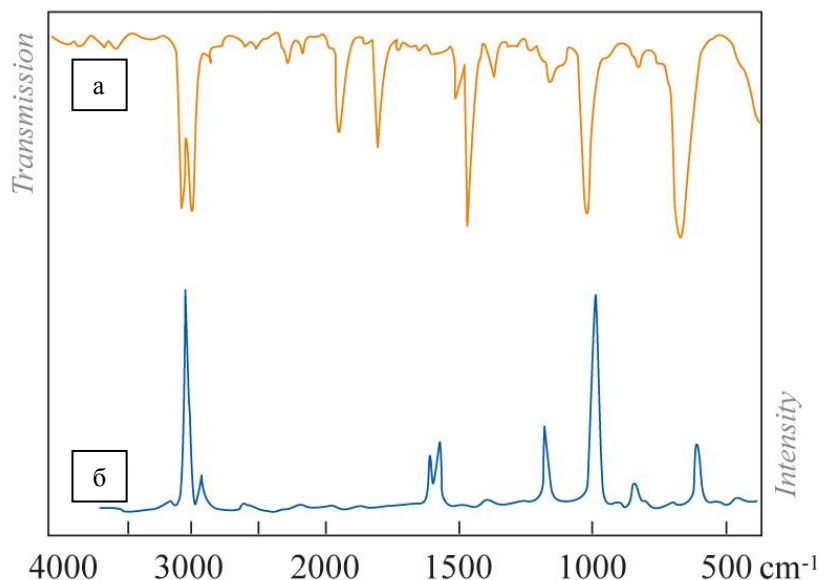
1) На рисунке приведён рентгеновский фотоэлектронный спектр поверхности монокристаллического кремния, подвергнутого термическому окислению в атмосфере кислорода.



Как называется явление смещения пика данного химического элемента при образовании химической связи?

Ответ: химический сдвиг

2) На рисунке приведены два спектра. Определите, какими спектроскопическими методами получены указанные спектры. Спектр а) _____ и спектр б) _____



Ответы: а) ИК-спектроскопия, инфракрасная спектроскопия, инфракрасная колебательная спектроскопия, б) спектроскопия комбинационного рассеяния, рамановская спектроскопия

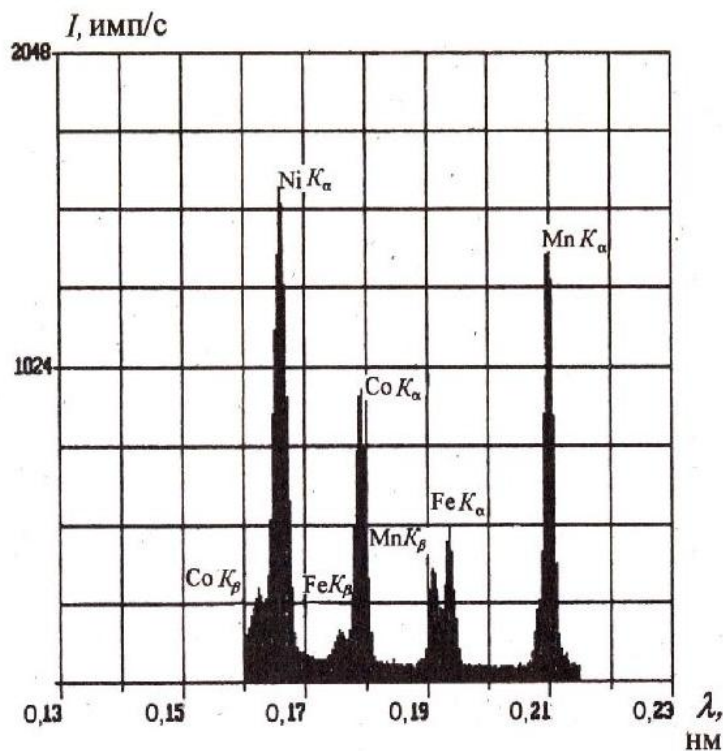
3) Определите длину волны де Бройля λ , характеризующую волновые свойства электрона (масса $9,1 \cdot 10^{-31}$ кг? $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ Дж·с), если его скорость составляет 10^6 м/с. Ответ выразите в нанометрах, без указания единиц измерения, округлите до сотых.

Ответ: 0,72

4) Определите длину волны де Бройля λ , характеризующую волновые свойства протона (масса $1,67 \cdot 10^{-27}$ кг, $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ Дж·с), если его скорость составляет 10^6 м/с. Ответ выразите в пикометрах, без указания единиц измерения, округлите до тысячных.

Ответ: 0,396

5) На рисунке приведён спектр металлического сплава



Каким спектроскопическим методом получен данный спектр?

Ответ: рентгеновский флуоресцентный анализ; рентгенофлуоресцентный анализ, рентгенофлуоресцентный, рентгенофлуоресцентный

3) практико-ориентированные задачи

- 1) Каковы принципы получения и построения профилей распределения элементов по толщине анализируемого образца?
- 2) Перечислите основные ограничения применения метода атомно-эмиссионной фотометрии пламени

Перечень заданий для оценки сформированности компетенции ПК-4:

1) закрытые задания (тестовые, средний уровень сложности):

- 1) Какой из перечисленных ниже методов нельзя использовать для анализа пробы, находящейся в жидком состоянии:
 - а) колебательная инфракрасная спектроскопия
 - б) рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия**
 - в) люминесцентный анализ
 - г) атомная абсорбционная спектроскопия
- 2) Какой из перечисленных методов требует глубокого вакуума и предварительной тщательной подготовки поверхности образца
 - а) атомный эмиссионный анализ
 - б) Ожэ-электронная спектроскопия**
 - в) спектроскопия комбинационного рассеяния
 - г) атомная абсорбционная спектроскопия
- 3) Для того чтобы молекула поглощала энергию ИК-излучения, она должна иметь:
 - а) отличный от нуля электронный спин
 - б) отличный от нуля дипольный момент**
 - в) отличный от нуля ядерный спин

г) существенный запас полной внутренней энергии.

4) Метод спектроскопии ЭПР применим только:

- а) к парамагнитным образцам
- б) к ферромагнетикам и диамагнетикам
- в) к правильно организованным монокристаллам
- г) к бесконечно разбавленным растворам

5) Какой из перечисленных ниже методов атомизации образца используется в атомно-абсорбционной спектроскопии:

- а) введение в пламя
- б) введение в дугу постоянного тока
- г) введение в дугу переменного тока
- д) с помощью искрового разряда
- е) ни один из перечисленных

6) Какие элементы нельзя определить методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопией:

- а) Н
- б) He
- в) Li
- г) Be

7) Оже-спектр – это зависимость интенсивности тока электронов от:

- а) кинетической энергии фотоэлектронов
- б) энергии связи
- в) энергии пропускания анализатора
- г) атомного номера.

2) практико-ориентированные задачи

1) В лабораторию доставлен образец минерала, в котором необходимо оценить содержание лития, рубидия и цезия. Предложите наиболее рациональный спектроскопический метод исследования, использующий излучение видимой части электромагнитного спектра

2) Сформулируйте требования, предъявляемые к образцам для определения элементного состава методом Оже-электронной спектроскопии

3) Сформулируйте требования, предъявляемые к образцам в методе рентгеновского флуоресцентного анализа

4) Перечислите основные этапы пробоподготовки

5) В чём заключается сущность методов внешнего и внутреннего стандарта при проведении количественного анализа

6) Сформулируйте требования, предъявляемые образцам, исследуемым методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии

7) Предложите спектроскопический метод (методы) контроля химического состава сырья для производства стекла

8) Предложите спектроскопический метод (методы) определения загрязнений в сырье для производства оксидно-циркониевой керамики

9) На производстве необходим многократный периодический контроль поступающей в технологический цикл воды на содержание ионов свинца. Предложите наиболее рациональный спектроскопический метод исследования

10) Перед технологом стоит задача контроля содержания легирующих элементов – ванадия, молибдена и вольфрама – в образцах выплавляемой стали. Предложите наиболее рациональный спектроскопический метод

Критерии и шкалы оценивания заданий ФОС:

Для оценивания выполнения заданий используется балльная шкала:

1) закрытые задания (тестовые, средний уровень сложности):

- 1 балл – указан верный ответ;
- 0 баллов – указан неверный ответ (полностью или частично неверный).

2) открытые задания (тестовые, повышенный уровень сложности):

- 2 балла – указан верный ответ;
- 0 баллов – указан неверный ответ (полностью или частично неверный).

3) открытые задания (практико-ориентированные задания, средний уровень сложности):

• 5 баллов – задание выполнено верно (получен правильный ответ, обоснован (аргументирован) ход выполнения (при необходимости));

• 2 балла – выполнение задания содержит незначительные ошибки, но приведен правильный ход рассуждений, или получен верный ответ, но отсутствует обоснование хода его выполнения (если оно было необходимым), или задание выполнено не полностью, но получены промежуточные (частичные) результаты, отражающие правильность хода выполнения задания, или, в случае если задание состоит из нескольких подзаданий, верно выполнено 50% таких подзаданий;

• 0 баллов – задание не выполнено или выполнено неверно (получен неправильный ответ, ход выполнения ошибочен или содержит грубые ошибки).

Задания раздела 20.3 рекомендуются к использованию при проведении диагностических работ с целью оценки остаточных результатов освоения данной дисциплины (знаний, умений, навыков).